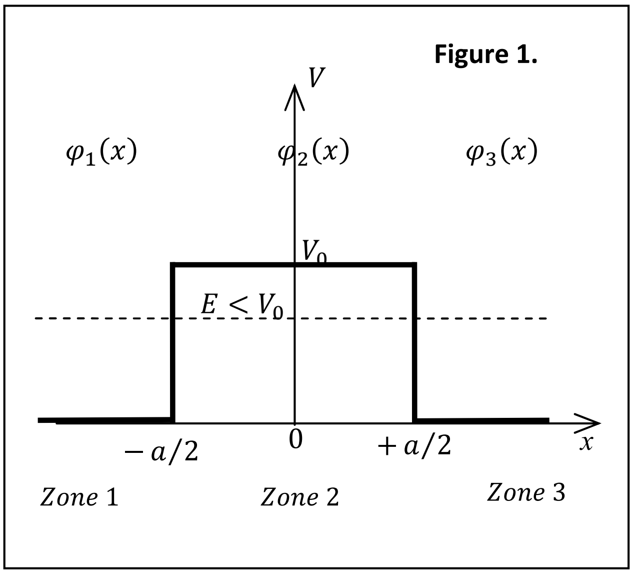
FACULTÉ DES SCIENCES EXACTES ET INFORMATIQUE

CORRIGÉ DE L'ÉPREUVE SEMESTRIELLE

MODULE : MÉCANIQUE QUANTIQUE.

EXERCICE 01: (10 points)

$$\begin{cases} V(x) = V_0 & x \in [-a/2, +a/2] \\ V(x) = 0 & \text{ailleur} \end{cases}$$



1. Equation de Schrödinger indépendante du temps.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\varphi(x) + V(x).\varphi(x) = E.\varphi(x)$$

En remplaçant

$$\begin{cases} Zone\ 1: & -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\varphi_1(x)}{dx^2} = E.\varphi_1(x) \\ Zone\ 2: & -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\varphi_2(x)}{dx^2} + V_0.\varphi_2(x) = E.\varphi_2(x) \\ Zone\ 3: & -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\varphi_3(x)}{dx^2} = E.\varphi_3(x) \end{cases}$$

Dont les solutions sont pour $E < V_0$:

$$\boxed{\begin{cases} \varphi_1(x) = A_1.e^{+ikx} + B_1.e^{-ikx} \\ \varphi_2(x) = A_2.e^{+\rho x} + B_2.e^{-\rho x} \\ \varphi_3(x) = A_3.e^{+ikx} + B_3.e^{-ikx} \end{cases}} \quad \text{avec} \quad \boxed{k = \sqrt{2m.E/\hbar^2}} \quad ; \quad \boxed{\rho = \sqrt{2m.(V_0 - E)/\hbar^2}}$$

Dans le cas d'une particule provenant de $x = -\infty$: $B_3.e^{-ikx}$ est une onde plane que provient de $x = +\infty$, elle n'as donc pas de sens physique, nous poserons alors $\boxed{B_3 = 0}$

Détermination des constantes

Continuité de la fonction d'onde en $x = -a/2$.

$$\varphi_1(x = -a/2) = \varphi_2(x = -a/2) \quad \Rightarrow \quad A_1.e^{-i\frac{ka}{2}} + B_1.e^{i\frac{ka}{2}} = A_2.e^{-\frac{\rho a}{2}} + B_2.e^{+\frac{\rho a}{2}} \quad \ldots\ldots(1)$$

Continuité de la dérivée première de la fonction d'onde en $x = -a/2$.

$$\varphi_1'(x = -a/2) = \varphi_2'(x = -a/2) \quad \text{avec} \quad \begin{cases} \varphi_1'(x) = ik\left(A_1.e^{+ikx} - B_1.e^{-ikx}\right) \\ \varphi_2'(x) = \rho(A_2.e^{+\rho x} - B_2.e^{-\rho x}) \end{cases}$$

Donc

$$A_1.e^{-i\frac{ka}{2}} - B_1.e^{i\frac{ka}{2}} = \frac{\rho}{ik}\left(A_2.e^{-\frac{\rho a}{2}} - B_2.e^{+\frac{\rho a}{2}}\right) \quad \ldots\ldots(2)$$

Continuité de la fonction d'onde en $x = +a/2$.

$$\varphi_2(x = +a/2) = \varphi_3(x = +a/2) \quad \Rightarrow \quad A_2.e^{+\frac{\rho a}{2}} + B_2.e^{-\frac{\rho a}{2}} = A_3.e^{+i\frac{ka}{2}} \quad \ldots\ldots(3)$$

Continuité de la dérivée première de la fonction d'onde en $x = +a/2$.

$$\varphi_2'(x = +a/2) = \varphi_3'(x = +a/2) \quad \text{avec} \quad \begin{cases} \varphi_2'(x) = \rho(A_2.e^{+\rho x} - B_2.e^{-\rho x}) \\ \varphi_3'(x) = ik.A_3.e^{+ikx} \end{cases}$$

Donc

$$A_2.e^{+\frac{\rho a}{2}} - B_2.e^{-\frac{\rho a}{2}} = \frac{ik}{\rho}A_3.e^{+i\frac{ka}{2}} \quad \ldots\ldots(4)$$

En faisant la somme $(3)+(4)$

$$2A_2.e^{+\frac{\rho a}{2}}=\left(1+\frac{ik}{\rho}\right)A_3.e^{+i\frac{ka}{2}} \quad\Rightarrow\quad \boxed{A_2=\frac{1}{2}\left(1+\frac{ik}{\rho}\right)A_3.e^{+i\frac{ka}{2}}e^{-\frac{\rho a}{2}}}$$

En faisant la différence $(3)-(4)$

$$2B_2.e^{-\frac{\rho a}{2}}=\left(1-\frac{ik}{\rho}\right)A_3.e^{+i\frac{ka}{2}} \quad\Rightarrow\quad \boxed{B_2=\frac{1}{2}\left(1-\frac{ik}{\rho}\right)A_3.e^{+i\frac{ka}{2}}e^{\frac{\rho a}{2}}}$$

En faisant la somme $(1)+(2)$

$$2A_1.e^{-i\frac{ka}{2}}=\left(1+\frac{\rho}{ik}\right)A_2.e^{-\frac{\rho a}{2}}+\left(1-\frac{\rho}{ik}\right)B_2.e^{+\frac{\rho a}{2}}$$

En remplaçant A_2 et B_2 .

$$A_1=\frac{1}{4}\left\{\left(1+\frac{\rho}{ik}\right)\left(1+\frac{ik}{\rho}\right)e^{-\rho a}+\left(1-\frac{\rho}{ik}\right)\left(1-\frac{ik}{\rho}\right)e^{+\rho a}\right\}A_3.e^{+ika}$$

Donc

$$\boxed{A_1=\left\{\cosh\rho a+\frac{1}{2}\left(\frac{\rho^2-k^2}{ik\rho}\right).\sinh\rho a\right\}A_3.e^{+ika}}$$

En faisant la différence $(1)-(2)$

$$2B_1.e^{i\frac{ka}{2}}=\left(1-\frac{\rho}{ik}\right)A_2.e^{-\frac{\rho a}{2}}+\left(1+\frac{\rho}{ik}\right)B_2.e^{+\frac{\rho a}{2}}$$

En remplaçant A_2 et B_2 .

$$B_1=\frac{1}{4}\left\{\left(1-\frac{\rho}{ik}\right)\left(1+\frac{ik}{\rho}\right).e^{-\rho a}+\left(1+\frac{\rho}{ik}\right)\left(1-\frac{ik}{\rho}\right).e^{+\rho a}\right\}A_3$$

Donc

$$\boxed{B_1=\frac{1}{2}\left(\frac{\rho^2+k^2}{ik\rho}\right).\sinh\rho a\,.A_3}$$

2. coefficient de transmission.

$$T=|A_3|^2/|A_1|^2$$

$$|A_1|^2=\left|\left\{\cosh\rho a+\frac{1}{2}\left(\frac{\rho^2-k^2}{ik\rho}\right).\sinh\rho a\right\}A_3.e^{+ika}\right|^2=\left|\left\{\cosh\rho a+\frac{1}{2}\left(\frac{\rho^2-k^2}{ik\rho}\right).\sinh\rho a\right\}\right|^2|A_3|^2$$

D'où

$$T=\left|\left\{\cosh\rho a+\frac{1}{2}\left(\frac{\rho^2-k^2}{ik\rho}\right).\sinh\rho a\right\}\right|^{-2}$$

$$\boxed{T=\frac{4\rho^2k^2}{4\rho^2k^2.\cosh^2\rho a+(\rho^2-k^2)^2.\sinh^2\rho a}}$$

3. Application numérique : $E=1\,eV$, $V_0=2\,eV$, $a=1\,\text{Å}$

Cas d'un électron : $m_e=9{,}1\times10^{-31}\ kg$ donc $k=\rho=5{,}1171\times10^{9}\ m^{-1}$ et $\boxed{T=0{,}7779}$

Cas d'un proton : $m_p=1{,}67\times10^{-27}\ kg$ donc $k=\rho=2{,}1921\times10^{11}\ m^{-1}$ et $\boxed{T=3{,}6447\times10^{-19}}$

EXERCICE 02 : (10 points)

$$V(x)=\frac{1}{2}m\omega^2x^2 \quad ; \quad \psi_0(x)=A_0.e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}} \quad ; \quad \psi_1(x)=A_1.x.e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}$$

1. **Normalisation :**

$$\int_{-\infty}^{+\infty}|\psi_0(x)|^2dx=\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_0^*(x).\psi_0(x).dx=1 \quad \Rightarrow \quad A_0^2\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-\frac{m\omega x^2}{\hbar}}dx=1$$

En utilisant

$$\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-a.x^2}dx=\sqrt{\pi}/a^{1/2} \quad \text{avec} \quad a=m\omega/\hbar \quad \text{on a} \quad \int_{-\infty}^{+\infty}e^{-\frac{m\omega x^2}{\hbar}}dx=\sqrt{\pi\hbar/m\omega}$$

D'où

$$\boxed{A_0=\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}}} \quad \text{et} \quad \boxed{\psi_0(x)=\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}}e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty}|\psi_1(x)|^2dx=\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_1^*(x).\psi_1(x).dx=1 \quad \Rightarrow \quad A_1^2\int_{-\infty}^{+\infty}x^2.e^{-\frac{m\omega x^2}{\hbar}}dx=1$$

En utilisant

$$\int_{-\infty}^{+\infty}x^2.e^{-a.x^2}dx=\sqrt{\pi}/2a^{3/2} \quad \text{avec} \quad a=m\omega/\hbar \quad \text{on a} \quad \int_{-\infty}^{+\infty}x^2.e^{-\frac{m\omega x^2}{\hbar}}dx=\sqrt{\pi\hbar^3/4m^3\omega^3}$$

D'où

$$\boxed{A_1=\left(\frac{4m^3\omega^3}{\pi\hbar^3}\right)^{\frac{1}{4}}} \quad \text{et} \quad \boxed{\psi_1(x)=\left(\frac{4m^3\omega^3}{\pi\hbar^3}\right)^{\frac{1}{4}}x.e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}}$$

2. **Orthogonalité :**

$$(\psi_0,\psi_1)=\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_0^*(x).\psi_1(x).dx=A_0A_1\int_{-\infty}^{+\infty}x.e^{-\frac{m\omega x^2}{\hbar}}.dx$$

En utilisant

$$\int_{-\infty}^{+\infty}x^{(2n+1)}e^{-a.x^2}dx=0 \quad \text{avec} \quad a=m\omega/\hbar \quad \text{on a} \quad \int_{-\infty}^{+\infty}x.e^{-\frac{m\omega x^2}{\hbar}}.dx=0$$

D'où

$(\psi_0,\psi_1)=0$ et les deux états sont othogonaux.

3. **Equation de Schrödinger :**

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_0(x)}{dx^2}+V(x)\psi_0(x)=E_0.\psi_0(x)$$

Comme

$$\frac{d^2\psi_0(x)}{dx^2}=\frac{d}{dx}\left(-A_0.\frac{m\omega x}{\hbar}e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}\right)=-A_0\frac{m\omega}{\hbar}\left\{e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}-\frac{m\omega x^2}{\hbar}e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}\right\}=-\frac{m\omega}{\hbar}\left(1-\frac{m\omega x^2}{\hbar}\right)\psi_0(x)$$

En remplaçant

$$+\frac{\hbar^2}{2m}\frac{m\omega}{\hbar}\left(1-\frac{m\omega x^2}{\hbar}\right)\psi_0(x)+\left(\frac{1}{2}m\omega^2x^2\right)\psi_0(x)=E_0.\psi_0(x)$$

Puisque $\psi_0(x)\neq 0$ on peut ecrire

$$\frac{\hbar^2}{2m}\frac{m\omega}{\hbar}\left(1-\frac{m\omega x^2}{\hbar}\right)+\left(\frac{1}{2}m\omega^2x^2\right)=\left(\frac{1}{2}\hbar\omega-\frac{1}{2}m\omega^2x^2\right)+\left(\frac{1}{2}m\omega^2x^2\right)=E_0 \quad \text{donc} \quad \boxed{E_0=\frac{1}{2}\hbar\omega}$$

$$\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_1(x)}{dx^2}+V(x)\psi_1(x)=E_1.\psi_1(x)$$

Comme

$$\frac{d^2\psi_1(x)}{dx^2}=\frac{d}{dx}\left(A_1.e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}-A_1.x\frac{m\omega x}{\hbar}e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}\right)=A_1\frac{d}{dx}\left\{\left(1-\frac{m\omega}{\hbar}x^2\right)e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}\right\}$$

$$\frac{d^2\psi_1(x)}{dx^2}=A_1\left\{\left(-2\frac{m\omega}{\hbar}x\right)e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}-\frac{m\omega x}{\hbar}\left(1-\frac{m\omega}{\hbar}x^2\right)e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}\right\}=\left(-3\frac{m\omega}{\hbar}+\frac{m^2\omega^2}{\hbar^2}x^2\right)\psi_1(x)$$

En remplaçant

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(-3\frac{m\omega}{\hbar}+\frac{m^2\omega^2}{\hbar^2}x^2\right)\psi_1(x)+\left(\frac{1}{2}m\omega^2x^2\right)\psi_1(x)=E_1.\psi_1(x)$$

Puisque $\psi_1(x)\neq 0$ on peut ecrire

$$\left(\frac{3}{2}\hbar\omega-\frac{1}{2}m\omega^2x^2\right)+\left(\frac{1}{2}m\omega^2x^2\right)=E_1 \qquad \text{donc} \qquad \boxed{E_1=\frac{3}{2}\hbar\omega}$$

4. Valeurs moyennes $\langle X\rangle_0$ et $\langle X\rangle_1$

$$\langle X\rangle_0=\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_0^*(x).X\psi_0(x).dx=\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_0^*(x).x\psi_0(x).dx$$

Donc

$$\langle X\rangle_0=A_0^2\int_{-\infty}^{+\infty}x.e^{-\frac{m\omega x^2}{\hbar}}dx \qquad \text{d'où} \qquad \boxed{\langle X\rangle_0=0}$$

$$\langle X\rangle_1=\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_1^*(x).X\psi_1(x).dx=\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_1^*(x).x\psi_1(x).dx$$

Donc

$$\langle X\rangle_1=A_1^2\int_{-\infty}^{+\infty}x^3.e^{-\frac{m\omega x^2}{\hbar}}dx \qquad \text{d'où} \qquad \boxed{\langle X\rangle_1=0}$$

(Nous avons utilisé $\int_{-\infty}^{+\infty}x^{(2n+1)}e^{-a.x^2}dx=0 \quad (n\in\mathbb{N})$)

5. Valeurs moyennes $\langle X^2\rangle_0$ et $\langle V\rangle_0$

$$\langle X^2\rangle_0=\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_0^*(x).X^2\psi_0(x).dx=\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_0^*(x).x^2\psi_0(x).dx$$

Donc

$$\langle X^2\rangle_0=A_0^2\int_{-\infty}^{+\infty}x^2.e^{-\frac{m\omega x^2}{\hbar}}dx$$

En utilisant

$$\int_{-\infty}^{+\infty}x^2.e^{-a.x^2}dx=\sqrt{\pi}/2a^{3/2} \qquad \text{avec} \qquad a=m\omega/\hbar \qquad \text{on a} \qquad \int_{-\infty}^{+\infty}x^2.e^{-\frac{m\omega x^2}{\hbar}}dx=\sqrt{\pi\hbar^3/4m^3\omega^3}$$

En replaçant on trouve :

$$\langle X^2\rangle=\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{2}}\left(\frac{\pi\hbar^3}{4m^3\omega^3}\right)^{\frac{1}{2}} \qquad \Rightarrow \qquad \boxed{\langle X^2\rangle=\frac{1}{2}\frac{\hbar}{m\omega}}$$

Valeur moyenne de l'énergie potentielle

$$V(X) = \frac{1}{2}m\omega^2 X^2 \qquad \Rightarrow \qquad \boxed{\langle V\rangle = \frac{1}{2}m\omega^2\langle X^2\rangle = \frac{1}{4}\hbar\omega}$$

6. Valeur moyenne $\langle H\rangle_0$.

En écrivant l'équation de Schödinger (qui est un équation aux valeurs propres).

$$H\psi(x) = E.\psi(x)$$

E étant une valeur constante réelle.
Donc

$$\langle H\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*(x).H\psi(x).dx = \int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*(x).E.\psi(x).dx = E\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*(x).\psi(x).dx$$

Puisque la fonction d'onde est normée

$$\langle H\rangle = E$$

Pour l'état $\psi_0(x)$ en particulier

$$\langle H\rangle_0 = \int_{-\infty}^{+\infty}\psi_0^*(x).H\psi_0(x).dx \qquad \text{donc} \qquad \boxed{\langle H\rangle_0 = E_0}$$

7. Valeurs moyennes $\langle T\rangle$ et $\langle P^2\rangle$

En écrivant l'opérateur Hamiltonien

$$H = T + V = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)$$

Donc

$$\langle H\rangle = \langle T\rangle + \langle V\rangle \qquad \text{ou} \qquad \langle T\rangle = \langle H\rangle - \langle V\rangle$$

Comme

$$\langle H\rangle_0 = E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega \qquad \text{alors} \qquad \boxed{\langle T\rangle_0 = \langle H\rangle_0 - \langle V\rangle_0 = \frac{1}{4}\hbar\omega}$$

Comme

$$T = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} = \frac{P^2}{2m} \qquad \Rightarrow \qquad \langle T\rangle = \frac{1}{2m}\langle P^2\rangle \qquad \text{et} \qquad \boxed{\langle P^2\rangle_0 = \frac{1}{2}m\hbar\omega}$$